



TITLE:

## 10.遷移金属における3d空孔の運動 (金属中の荷電粒子の運動,研究会報告)

AUTHOR(S):

五十嵐, 潤一

---

CITATION:

五十嵐, 潤一. 10.遷移金属における3d空孔の運動(金属中の荷電粒子の運動,研究会報告). 物性研究 1984, 43(1): 68-73

ISSUE DATE:

1984-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91455>

RIGHT:

陽電子はフォノンの衣も同時にまとっているはずであるが、それによる有効質量の増大は1~2%に過ぎない。しかし、フォノン散乱による陽電子の状態のダンピングの効果で運動量分布の幅がみかけ上広がり、かつ長い尾をひくようになる(ガウス型の分布がローレンツ型の様相を帯びてくる)ことが指摘されている<sup>9)</sup>この効果を見捨てた従来の実験の解析は、みかけの有効質量を与えていたに過ぎない可能性が高い。

最近Kに対して再実験が行われ、この効果を考慮した解析が行われた<sup>8)</sup>その結果、真の有効質量が  $m^* = 1.4m$  であることがわかり、同時に陽電子-フォノン結合定数も求められた。

## 文 献

- 1) 藤原邦男・兵頭俊夫：日本物理学会誌 **38** (1983) 936.
- 2) J. P. Carbotte: "Positron Solid State Physics", Proc. Intern. School Phys. "Enrico Fermi", No. 86 (North-Holland, 1983), p. 32.
- 3) P. Kubica and A. T. Stewart: Phys. Rev. Letters **34** (1975) 852.
- 4) A. P. Mills Jr.: "Positron Solid State Physics" Proc. Intern. School Phys. "Enrico Fermi", No. 83 (North-Holland, 1983), p. 432.
- 5) B. Bergersen, E. Pajanne, P. Kubica, M. J. Stott and C. H. Hodges: Solid State Commun. **15** (1974) 1377.
- 6) C. H. Leung, T. McMullen and M. J. Stott: J. Phys. F**6** (1976) 1063.
- 7) C. H. Hodges and T. Trinkaus: Solid State Commun. **18** (1976) 857.
- 8) T. Hyodo, T. McMullen and A. T. Stewart "Positron Annihilation," Proc. 6th Intern. Conf. Positron Annihilation (North-Holland, 1982) p. 201. T. McMullen, T. Hyodo and A. T. Stewart, *ibid.* p. 204. also *Cau. J. Phys.* **62** (1984) 297.
- 9) H. Mikeska: Phys. Letters A**24** (1967) 402. Z. Phys. **232** (1970) 159.

## 10. 遷移金属における3d空孔の運動

阪大理 五十嵐 潤 一

### 1. 序 論

3d空孔の状態を直接的に反映する実験として光電子分光をあげることができる。光を照射して放出させる電子のエネルギースペクトルを測定する実験で、電子のぬけた状態(空孔)の

エネルギー・スペクトルを求めることができる。最近、角度分解光電子分光により、多くの固体で空孔のスペクトルが測定され、バンド計算のエネルギー・分散関係と比較されている。また2つの3d空孔ができた状態は、共鳴光電子分光によって観測できる。これは、照射光のエネルギーが内殻準位とフェルミ準位との差に相当する値を通過する時、共鳴的にスペクトル強度が増大する現象である。2個の3d空孔は、いったん内殻電子がフェルミ準位より上にある状態に光学励起され、それにひきつづいたCoster-Kronig遷移によってつくられる。以下議論する強磁性ニッケルの場合、実験<sup>1)</sup>はバンド計算とかなり違う結果を与えている。すなわち、(1)交換分裂(同じ波数をもつ状態の↑スピンと↓スピンのエネルギー差)は、バンド計算の約半分である。(2)3dバンド幅は、バンド計算より30%もちぢんでいる。(3)フェルミ準位から6eVはなれた位置にサテライトがあらわれ、共鳴的に増大する。これらの食い違いは、電子相関の効果によるものと考えられる。

せまいバンドの電子相関は、遷移電子磁性の基本的問題の1つであり、かなり以前、ハバード、グッツビラー、金森等により重要な進歩がもたらされた。特に金森<sup>2)</sup>は、電子数が少ない極限で正確な解を与える*t*-行列理論を提案し、ニッケルの強磁性を議論した。その後、電子-マグノン相互作用を考慮することで、金森理論を拡張する試みがなされたが、<sup>3)</sup>電子-マグノン多重散乱と電子-電子多重散乱を結びつける点にあいまいな所があった。筆者<sup>4)</sup>は、三体相関まで正確に考慮することで、上記のあいまいさのない理論を発展させた。以下では、この理論を概略したあと、一次元ハバードモデルに適用し、厳密解と比較することで理論の妥当性を吟味する。次いでニッケルに対するモデルに適用し、光電子分光と関連した問題点を議論する。最後に、三体相関の重要な例として、半導体、絶縁体での共鳴光電子放出をとりあげ、遷移金属の場合と比較して議論する。

## 2. 三体相関理論<sup>4)</sup>

次のハバードハミルトニアンを用いる。

$$H = \sum_k [(\varepsilon(k) - \mu) a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} + (\varepsilon'(k) - \mu) a_{k\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow}] + (U/N) \sum_{p_1 p_2 q} a_{p_1+q\downarrow}^\dagger a_{p_2-q\uparrow}^\dagger a_{p_2\uparrow} a_{p_1\downarrow} \quad (2.1)$$

ここで  $a_{k\sigma}^\dagger$  はスピン  $\sigma$ 、運動量  $k$  のブロッホ電子を生成する演算子であり、 $U$  はクーロン相互作用、 $\mu$  は化学ポテンシャル、 $\varepsilon(k)$ 、 $\varepsilon'(k)$  は運動エネルギーである。以下、議論を↓スピンバンドには電子が1個しか存在しない場合に限る。この理論では、中間状態における電子-正孔対1つを含む三粒子相関を、ファデーフ理論<sup>5)</sup>を用いて正確に考慮する。粒子3と2との多重散乱のみを考慮すると金森理論がえられる。また、粒子3と1との多重散乱を考慮すること

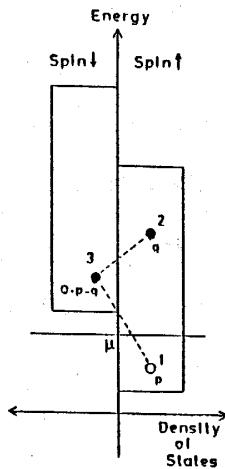


図1. 3粒子状態の略図

でマグノンの効果はとり入れられる。詳細は省略して、一次元モデル, すなわち,  $\varepsilon(k) = -2t \cos k \equiv \varepsilon'(k)$ , の場合に適用した結果を厳密解と比較して示す。<sup>6)</sup>

### (1) 基底状態エネルギー

図2に示されたように, 厳密解 (McGuire-Lieb-Wu) との一致は大変よい。

### (2) 基底状態の相関関数

図3に, 原点に↓スピン電子がある場合の↑スピン電子の分布を与える相関関数を示した。↑スピン電子と↓スピン電子とは, さけあって運動している。三体相関を考慮することで, ↓スピン電子近傍の分布が改良される。

### (3) 一粒子励起スペクトル

光電子分光で観測されるスペクトルと対応している。(電子→空孔とおきかえて考える。) 図4からわかるように, 有限系の数値的に厳密な計算と比較して大変よく一致している。

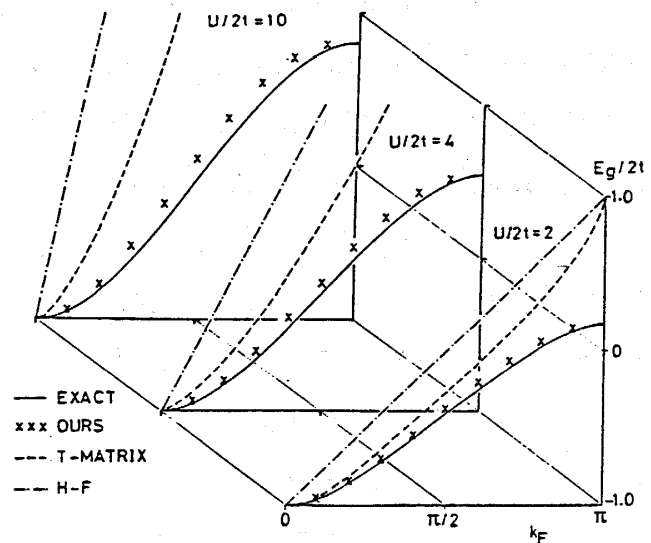


図2. 基底状態エネルギー。 $k_F \equiv \pi(N_e - 1)/N$   $N_e - 1$ は↑スピン電子数。エネルギーは, 相互作用のない  $N_e - 1$  個の↑スピン電子系のエネルギーから測られる。実線は厳密解。×印は三体相関理論。波線は金森理論。一点破線はハートリー・フォック近似。

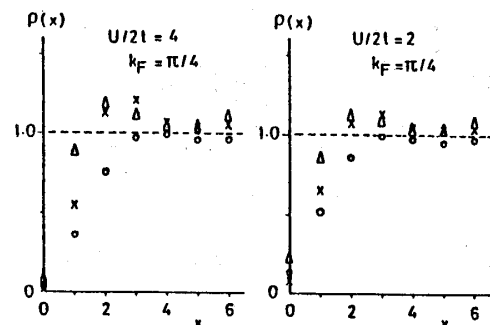


図3. 基底状態の対相関関数。原点に↓スピン電子があるとした時のもの。

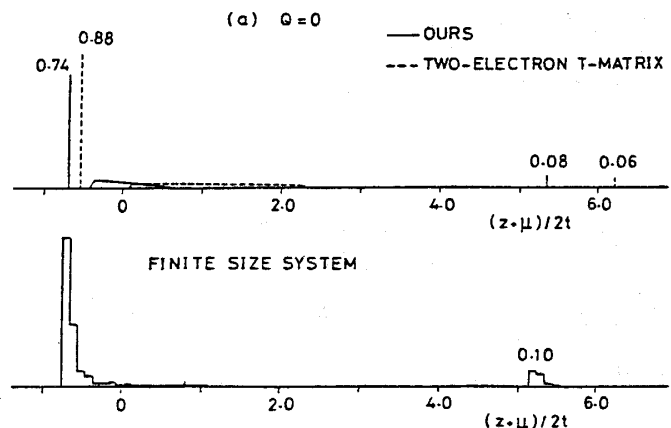


図4. 一粒子励起スペクトル。 $Q$ は全運動量。 $Z$ はエネルギー。ヒストグラムは有限系での数値解。スペクトルの上につけられた数字は強度を示す。(全体で1。)

3. ニッケルへの応用<sup>4)</sup>

三体相関理論が十分正確なスペクトルを与えることが、以上のことからわかった。この理論をニッケルの強磁性状態に適用してみる。↓スピンdバンドがすべて占有されており、↑スピンdバンドには0.6個空孔があるとする。0.6個の空孔は、主として3つの縮重したバンドに分布しているので、1バンドとして0.2個↑スピン空孔があるとし、縮重の効果を全く同一のバンドが3つあるとしてとり入れる。前章の理論は、電子↔空孔とおきかえればそのまま今の場合に用いることができる。

表1. Niの有効バンド幅とサテライト

$U$	有効バンド幅/ $w$	サテライトのフェルミ準位からの位置
$1.05w$	0.73	$\sim 9\text{ eV}$
$0.64w$	0.83	$\sim 7\text{ eV}$

$w$ はもとのバンド幅。

半定量的な見地からは問題が残る。即ち、バンド幅の縮みを実験結果に合わそうとすればクーロン相互作用をバンド幅より大きくとらねばならず、そうするとサテライトの位置はフェルミ準位から6eVよりももっと離れる。この事は、すでに指摘されているように<sup>7)</sup> 4s電子の遮蔽効果を考慮することで解決できるかもしれない。

## 4. 半導体、絶縁体における共鳴光電子分光

三体相関が重要になる例として、半導体、絶縁体での共鳴光電子スペクトルを、次の2バンド・ハバードモデルに基づいて考察しよう。

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{k\sigma} \varepsilon_V(k) a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_C(k) b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} \\
 & + (U_{VV}/N) \sum_{p_1 p_2 q} a_{p_1+q\downarrow}^\dagger a_{p_2-q\downarrow}^\dagger a_{p_2\uparrow} a_{p_1\downarrow} \\
 & + (U_{VC}/N) \sum_{p_1 p_2 q} \sum_{\sigma\sigma'} a_{p_1+q\sigma}^\dagger b_{p_2-q\sigma'}^\dagger b_{p_2\sigma'} a_{p_1\sigma}
 \end{aligned}$$

ここで、 $a^\dagger$ ,  $b^\dagger$ は、それぞれ、価電子、伝導電子の生成演算子であり、 $U_{VV}$ ,  $U_{VC}$ は、それぞれ、価電子同士、および、価電子と伝導電子間の、クーロン相互作用である。終状態では、価電子帯に空孔が2個、伝導体に電子が1個つくられている。

この三体問題は、前章で述べた理論を拡張することで解ける。理論の詳細は省略して、 $\varepsilon_V(k) = -\frac{W_V}{\pi}|k|$ ,

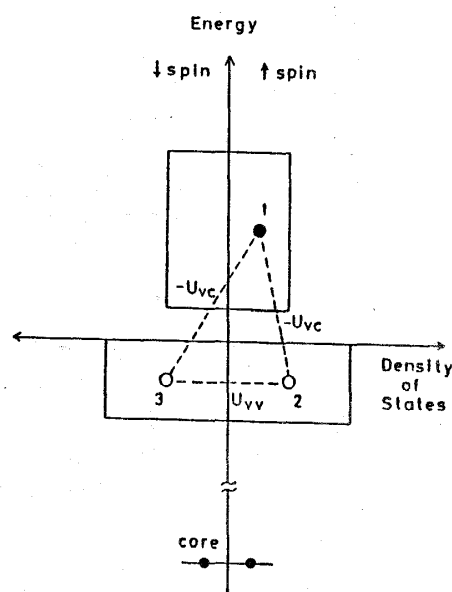


図5. 半導体、絶縁体の共鳴光電子放出の終状態。

$\varepsilon_C(k) = \frac{W_C}{\pi} |k| + B$ ,  $W_C/W_V = 2$ , の1次元モデルに適用した結果を以下に示そう。三体束縛状態 (trion) の存在する領域を図6に trion の波動関数を表2に示した。 $U_{VC}$  が変化しても,

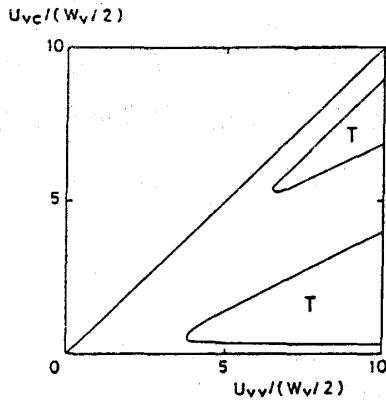


図6. 3体束縛状態の存在する領域。  
(文字Tをもつ領域。)

表2. 三体束縛状態の波動関数  $\psi(x_1, x_2, x_3)$  粒子3の位置  $x_3$  を原点に, そして原点の振幅を1となるようにした。エネルギー単位は  $W_V/2$  である。

$U_{VV}=8$ $U_{VC}=0.5$			$U_{VV}=8$ $U_{VC}=2$			$U_{VV}=8$ $U_{VC}=6.5$		
$x_1$	$x_2$		$x_1$	$x_2$		$x_1$	$x_2$	
0	1.0	-0.08	0	1	-0.08	0	1.0	0.008
1	0.59	-0.08	1	0.19	-0.08	1	0.06	0.008

粒子2の粒子3に対する振幅の空間分布はほとんど変化しないことに注意しよう。図7で, 中間状態での内殻空孔と伝導電子との相互作用  $-U_{core}/(W_V/2)$

$= -1.5$  とした場合のスペクトルを示した。相関の強い場合は, サテライトピークはtrionから成り, 入射光のエネルギーがしきい値をこえても消えずに残る。このスペクトルは, CuI, Cu<sub>2</sub>O等の実験に対応していると思われる。相関の弱い場合, 幅の広いサテライトがあらわれるが, 入射光のエネルギーを増大させると, オージェスペクトルにとけこんでしまう。

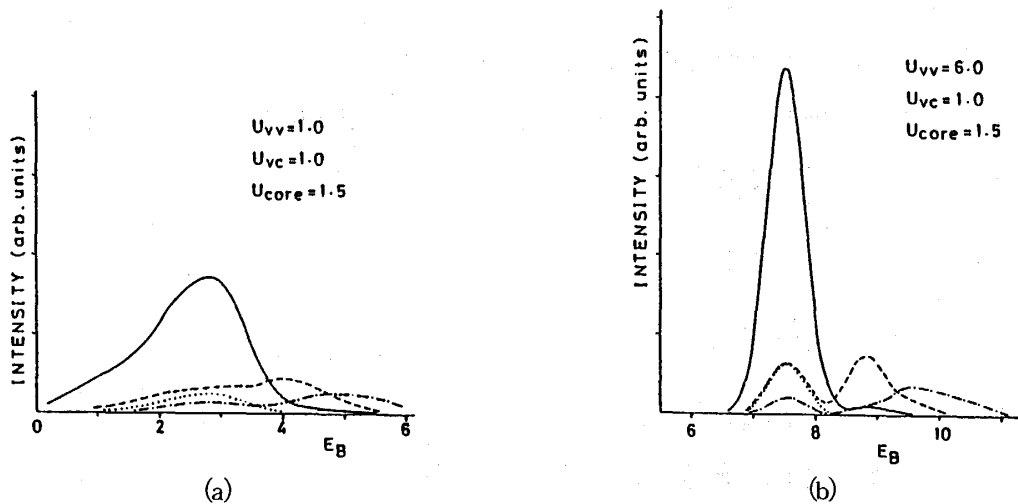


図7. 共鳴光電子スペクトル。 $E_B$ は, 入射光のエネルギーと光電子のエネルギーとの差。エネルギー単位はすべて  $W_V/2$ 。  
点線, 実線, 破線, 一点破線は  $\Delta\nu \equiv \nu - \nu_0 = -1.0, 0, 1.0, 2.0$  に対応する。ここで  $\nu$  は入射光のエネルギー,  $\nu_0$  はしきい値。

## 5. 結 語

銅, ニッケルでの共鳴光電子分光は, 終状態で2つの3d空孔は同じ原子位置に強く束縛されており止まっているとの仮定のもとで3d, 4s電子の遮蔽効果を考慮して, 解析されている。

一方、ハバードモデルを用いた理論によれば、束縛状態は非常にゆっくりとしか並進運動しないが、2つの空孔の相対的振幅は空間的にかなりひろがっている<sup>4)</sup>。ここで、前章の trion の波動関数において、2つの空孔の相対振幅は、 $U_{VC}$  を大きくしてもほとんど変化しないという事を思い出そう。4s 電子の遮蔽効果においても同様の事が起こっていると考えれば、2つの3d空孔の束縛状態は、ハバードモデルで用いるクーロン相互作用定数で決まっているのではなく、裸の大きなクーロン相互作用定数で決まっていると考える方がよいのかもしれない。このことをはっきりさせるため、3d空孔2個とそれを遮蔽する4s電子とが存在するモデルで、有限系の数値計算を進めている。

## 文 献

- 1) F. J. Himpsel, J. A. Knapp and D. E. Eastman: Phys. Rev. **B19** (1979) 2919.
- 2) J. Kanamori: Prog. Theor. Phys. **30** (1963) 275.
- 3) L. M. Roth: Phys. Rev. **186** (1969) 426; J. A. Herty and D. M. Edwards: J. Phys. **F3** (1973) 2174; A. Liebsch: Phys. Rev. **B23** (1981) 5203.
- 4) J. Igarashi: J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1973) 2827.
- 5) L. D. Faddeev: Sov. Phys. -JETP **12** (1961) 1014.
- 6) J. Igarashi: be submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
- 7) J. Kanamori: *Electron Correlation and Magnetism in Narrow-Band Systems*, ed. T. Moriya (Springer-Verlag, 1981) p. 102.